

# 氦同位素原子与钠分子碰撞转动激发 积分散射截面的理论计算\*

李文峰<sup>1)</sup> 令狐荣锋<sup>1)2)</sup> 程新路<sup>1)</sup> 杨向东<sup>1)†</sup>

1) (四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

2) (贵州师范大学物理与电子科学学院, 贵阳 550001)

(2009 年 7 月 10 日收到; 2009 年 8 月 24 日收到修改稿)

多体刚性椭球模型是一种比较精确的描述氦原子与钠分子碰撞的理论模型. 本文用多体刚性椭球模型计算了不同能量下 He 的同位素原子<sup>3</sup>He, <sup>4</sup>He, <sup>7</sup>He, <sup>10</sup>He 与 Na<sub>2</sub> 分子碰撞的转动激发积分散射截面, 表明增加椭球等势面个数可以得到更准确的转动激发积分散射截面; 总结出<sup>3</sup>He, <sup>4</sup>He, <sup>7</sup>He, <sup>10</sup>He-Na<sub>2</sub> 碰撞体系转动激发积分散射截面随相对入射能量和体系约化质量变化的规律; 讨论了相对入射能量为 100 meV 时, 相互作用势的不同区域对<sup>4</sup>He-Na<sub>2</sub> 碰撞体系转动激发积分散射截面的影响情况.

**关键词:** 多体刚性椭球模型, 氦同位素原子, 积分散射截面, 椭球等势面

**PACC:** 3450, 3450E

## 1. 引 言

原子分子碰撞过程是原子分子物理的重要研究方向之一, 激光物理、化学反应动力学、天体物理、等离子体物理等方面均与碰撞过程密切相关. 近年来, 原子与双原子分子的振动和转动激发及非弹性碰撞越来越引起人们的兴趣<sup>[1-10]</sup>, 这不仅是因为转动能量转移在气相弛豫<sup>[11]</sup>等很多物理过程中起着重要的作用, 而且从转动非弹性散射截面的实验测量和理论计算中可以获得原子分子间相互作用势的许多信息<sup>[12-16]</sup>, 同时交叉分子束实验技术的发展也要求对原子与双原子分子碰撞过程进行更深入的理论研究. 另外, 它在冲击波、声波、气体激光器设计、转动激发的共振荧光过程及星际空间的冷却过程等科技领域有重要的理论意义.

当前, 对超冷分子的研究成为一个极具活力的研究领域<sup>[17-22]</sup>, 用一定技术将碱金属原子冷却到 nK 附近可以产生超冷分子, 超冷分子物理的发展为广义相对论时空特性的探索、玻色-爱因斯坦凝聚体

和费米简并气体量子相变的精密测量、量子计算机的发展等开辟了新的路径, 具有重要的理论和实际意义. 因此, 研究 Na<sub>2</sub> 的相关特性对冷分子物理的研究和应用具有重要价值, 本文拟对 He 与 Na<sub>2</sub> 碰撞的转动激发积分散射截面进行研究.

人们对<sup>4</sup>He-Na<sub>2</sub> 碰撞的研究一直保持着浓厚的兴趣, Bowman<sup>[23]</sup> 和 Schepper 等<sup>[24]</sup> 分别用单体刚性椭球模型讨论了彩虹现象等, Schinke 等<sup>[25]</sup> 提出了 He-Na<sub>2</sub> 体系的势能面, 用 IOS (infinite order sudden) 近似方法计算研究了微分散射截面和积分散射截面等, McCaffery<sup>[3]</sup> 研究了<sup>4</sup>He-Na<sub>2</sub> 碰撞体系的振转激发速率常数等. 本文采用的多体刚性椭球模型是在单体刚性椭球模型基础上发展而来的, 比较成功地解决了单体刚性椭球模型在处理 He-Na<sub>2</sub> 碰撞体系时的局限性<sup>[1]</sup>, 能够对碰撞所引起的 Na<sub>2</sub> 分子转动激发的根源给予比较清晰的解释, 是计算 He-Na<sub>2</sub> 碰撞体系转动激发积分散射截面的有效方法<sup>[1-4]</sup>.

对同位素替代效应的研究是原子分子碰撞诸

\* 国家自然科学基金 (批准号: 10974139, 10964002)、高等学校博士学科点专项科研基金 (批准号: 20050610010)、贵州省教育厅自然科学基金重点项目 (批准号: 2005105)、贵州省优秀科技教育人才省长基金 (批准号: 2006 (113))、贵州省科学技术基金 (批准号: [2009] 2066) 和安徽省高校省级自然科学研究重点项目 (批准号: KJ2010A227) 资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: xdyang@scu.edu.cn

多研究方向的前沿之一<sup>[26,27]</sup>. 这是由于参与碰撞过程的某些原子具有数种同位素, 通过研究此类原子与分子碰撞过程中的同位素替代效应, 可以获得实际体系中各种同位素效应的大小并确定在测量中由此效应引起的精度变化. 此外, 同位素替代有可能提供更多原子和双原子分子间相互作用势的有价值信息. 迄今为止, 虽然对<sup>4</sup>He-Na<sub>2</sub> 碰撞进行了一定的研究, 但尚未见 He 同位素原子与 Na<sub>2</sub> 分子碰撞的相关报道. 本文拟对 He 同位素原子<sup>3</sup>He, <sup>4</sup>He, <sup>7</sup>He, <sup>10</sup>He-Na<sub>2</sub> 碰撞体系的转动激发积分散射截面进行理论计算和研究.

## 2. 理论计算方法<sup>[1]</sup>

选择一组刚性椭球面表示 He 与 Na<sub>2</sub> 间的相互作用, 每个椭球面表示一个等势面, 入射 He 与椭球等势面碰撞而发生散射. 椭球等势面的选择与相对入射能量  $E_i$  有关,  $E_i$  越高, 需要的椭球等势面个数越多, 这些椭球等势面有共同的中心  $O$ , 即 Na<sub>2</sub> 分子质心, 在分子固定坐标系  $(X, Y, Z)$  中第  $i$  个椭球面可表示为

$$\frac{X^2}{A_i^2} + \frac{Y^2}{B_i^2} + \frac{Z^2}{B_i^2} = 1, \quad (1)$$

式中,  $A_i, B_i$  分别是第  $i$  个椭球的长、短半轴, 对应  $\alpha = 0^\circ, \alpha = 90^\circ$  时根据一定  $V$  值计算出  $R$  值,  $V$  是 Schinke 等<sup>[25]</sup> 提出的 He 与 Na<sub>2</sub> 间相互作用势的解析表达式,  $|R|$  是入射原子到原点  $O$  的距离,  $\alpha$  为  $R$  与 Na<sub>2</sub> 分子键轴间的夹角.

计算转动激发积分散射截面时, 第  $i$  个椭球等势面实际取的势能值  $V_i$  与推导  $A_i, B_i$  所取的势能值  $V$  不一定严格相等,  $V_i$  一般按下式要求选择:

$$V_{i-1} < V \leq V_i. \quad (2)$$

假设入射 He 在  $xOy$  平面沿  $x$  轴正方向射向椭球面, 如图 1 所示. 图 1 中  $(X, Y, Z), (x, y, z)$  分别是分子固定坐标系和空间固定坐标系 ( $Z, z$  轴未标出),  $v_i$  是入射原子初相对运动速度,  $v_n = v_i \cdot n$  是碰撞点相对速度法向分量,  $n$  是碰撞点椭球面单位法向量,  $b$  为碰撞参数,  $b_n$  是有效碰撞参数, 为 Na<sub>2</sub> 质心到  $n$  的垂直距离.

首先判断入射原子是否与最外层椭球等势面存在碰撞点, 若有, 比较法向动能  $E_n = \frac{\mu v_n^2}{2}$  与势能  $V_i$  的关系, 如果  $E_n \leq V_i$ , 那么入射原子与此椭球面发

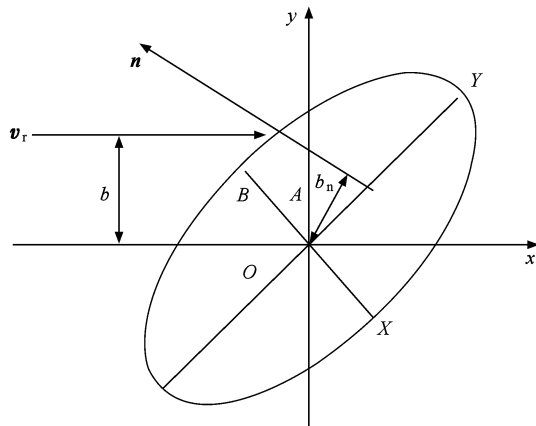


图 1 入射原子与椭球面碰撞的平面图形

生碰撞, 如果  $E_n > V_i$ , 那么入射原子不与此椭球面碰撞, 继续沿  $x$  轴做直线运动, 直到与某一个椭球面发生碰撞或者错过所有的椭球面. 假设碰撞前 Na<sub>2</sub> 不转动, 碰撞后 Na<sub>2</sub> 的转动角动量  $j'$  为

$$j' = \frac{2Il}{\mu b_n^2 + I}, \quad (3)$$

式中,  $\mu$  是 He-Na<sub>2</sub> 碰撞体系的约化质量,  $I$  是 Na<sub>2</sub> 分子转动惯量,  $l = \mu v_n b_n$ .

通过下式把 Na<sub>2</sub> 的转动角动量  $j'$  化成相应的量子转动态  $J'$ , 有

$$\hbar(J' - 1) \leq j' < \hbar(J' + 1), \quad (4)$$

那么,  $j' = J'\hbar$ ,  $J'$  是 Na<sub>2</sub> 的转动角动量量子数.

为了计算 He-Na<sub>2</sub> 碰撞体系的转动激发积分散射截面, 采用了蒙特卡罗 (MC) 方法来模拟大量 He 与 Na<sub>2</sub> 碰撞的过程, 总模拟次数  $N$  为 1000000 次. 在 B-O (Born-Oppenheimer) 近似下, 同位素替代不影响体系的相互作用势, 对<sup>4</sup>He-Na<sub>2</sub> 的同位素替代体系<sup>3</sup>He, <sup>7</sup>He, <sup>10</sup>He-Na<sub>2</sub>, 不仅其势能面不变, 靶分子的质心也没有因为同位素替代而发生移动, 故其在质心坐标系中的势能函数保持不变.

$J = 0 \rightarrow J'$  的态态转动激发积分散射截面  $\sigma$  由下式给出:

$$\sigma(J = 0 \rightarrow J') = \frac{n(J')}{N} \pi b_{\max}^2, \quad (5)$$

式中,  $n(J')$  是产生转动角动量量子数  $J'$  的 MC 模拟次数,  $b_{\max} = A_{i\max}, A_{i\max}$  是最外层椭球的长半轴.

总转动激发积分散射截面  $\sigma_{\text{tot}}$  为

$$\sigma_{\text{tot}} = \sum_{J'=2,4,6,\dots} \sigma(J = 0 \rightarrow J') = \frac{n_{\text{hits}}}{N} \pi b_{\max}^2, \quad (6)$$

其中  $n_{\text{hits}}$  是 MC 模拟中入射原子与所有椭球等势面

碰撞的总次数.

### 3. 计算结果及讨论

人们公认 IOS 近似方法是计算 He 与 Na<sub>2</sub> 碰撞比较准确的一种理论方法<sup>[25]</sup>. Marks<sup>[1]</sup> 选用了 4, 5, 8

个椭球等势面分别计算了  $E_r = 50, 100, 200$  meV 时 <sup>4</sup>He-Na<sub>2</sub> 碰撞的态态转动激发积分散射截面, 本文也采用多体刚性椭球模型, 选择了 5, 9, 12 个椭球等势面计算了上述不同能量时 <sup>4</sup>He 与 Na<sub>2</sub> 碰撞的态态转动激发积分散射截面, 计算结果列于表 1 中.

表 1 <sup>4</sup>He 与 Na<sub>2</sub> 碰撞的转动激发积分散射截面

$J'$	IOS 近似方法计算结果			Marks 计算结果 <sup>[1]</sup>			本文计算结果		
	$\sigma(J = 0 \rightarrow J') / \text{\AA}^2$			$\sigma(J = 0 \rightarrow J') / \text{\AA}^2$			$\sigma(J = 0 \rightarrow J') / \text{\AA}^2$		
	50 meV	100 meV	200 meV	50 meV	100 meV	200 meV	50 meV	100 meV	200 meV
2	26.49	22.96	19.96	23.23	16.96	13.05	25.04	19.53	14.58
4	17.75	14.35	11.92	18.10	14.28	10.34	18.08	14.70	11.92
6	12.52	10.63	8.78	11.74	10.46	7.57	12.52	10.73	8.97
8	11.01	8.01	6.60	11.15	7.56	6.57	11.13	7.92	6.60
10	6.72	6.46	5.38	6.25	6.64	5.56	7.15	6.86	5.37
12	2.92	5.75	4.38	1.10	6.36	4.83	2.91	6.24	4.09
14		4.10	3.78		3.39	3.36		4.20	3.78
16		2.19	3.02		1.63	3.25		2.33	3.11
18		0.78	2.03		0.00	2.65		0.10	2.61
20			1.98			2.41			2.00
22			1.83			1.81			1.30
24			1.29			0.52			1.27
26			0.81			0.00			1.08
28			0.36			0.00			0.37

从表 1 可以看出, 本文计算的 <sup>4</sup>He-Na<sub>2</sub> 碰撞体系的态态转动激发积分散射截面与 IOS 近似方法计算结果符合较好. 与 Marks<sup>[1]</sup> 的计算结果相比, 本文计算结果与 IOS 方法计算结果符合得更好一些, 尤其当相对碰撞能量  $E_r = 50$  meV 时,  $J' = 2, 6, 12$  所对应的转动激发积分截面结果更接近 IOS 结果; 在  $E_r = 100$  meV 时,  $J' = 8, 14, 16$  所对应的转动激发积分截面的结果更接近 IOS 结果; 在  $E_r = 200$  meV 时,  $J' = 4, 6, 8, 10, 14, 20, 24, 26, 28$  所对应的转动激发积分截面的结果更接近 IOS 结果, 当  $J' = 26, 28$  时, Marks 计算的结果为 0, 而本文计算的结果分别为 1.08, 0.37  $\text{\AA}^2$  ( $1 \text{\AA} = 0.1 \text{ nm}$ ), 与 IOS 结果比较接近. 总之, 本文计算结果较 Marks 的结果更接近于 IOS 近似方法的结果, 这是因为相对碰撞能量  $E_r = 50, 100, 200$  meV 时, 本文计算积分散射截面时分别选择了 5, 9, 12 个椭球等势面, 与 Marks 在计算时所选的 4, 5, 8 个椭球等势面相比, 本文选择的椭球等势面更多, 因而更加详尽准确地表示了 He-Na<sub>2</sub> 体系

相互作用势不同区域对散射截面的影响. 此外, 本文 MC 模拟的次数是 1000000 次, 较 Marks 计算所采用的 20000—50000 次更多, 因而更加真实地模拟了 <sup>4</sup>He-Na<sub>2</sub> 碰撞体系的实际情形. 这表明, 用多体刚性椭球模型来计算 He 与 N<sub>2</sub> 散射时, 为了得到更准确的态态转动激发积分散射截面, 应该选取足够多的椭球等势面和 MC 模拟的次数.

从以上计算中看出, 我们使用多体刚性椭球模型计算方法是比较可靠的, 在此基础上, 我们计算了相对碰撞能量  $E_r = 50, 100, 200$  meV 时 He 同位素原子 <sup>3</sup>He, <sup>7</sup>He, <sup>10</sup>He 与 Na<sub>2</sub> 碰撞的转动激发积分散射截面, 计算结果分别见图 2、图 3 和图 4.

从图 2—4 中可以看出, 对于确定的入射能量  $E_r$ , 态态转动激发积分散射截面  $\sigma$  随转动量子态  $J'$  的变化规律非常相似, 即  $\sigma$  随着转动量子态  $J'$  的升高逐渐减小, 都是  $J = 0 \rightarrow J' = 2$  的转动激发积分散射截面值  $\sigma$  最大, 直到最后收敛, 大体上呈负指数衰减形式. 这说明低转动激发态被激发的概率要大

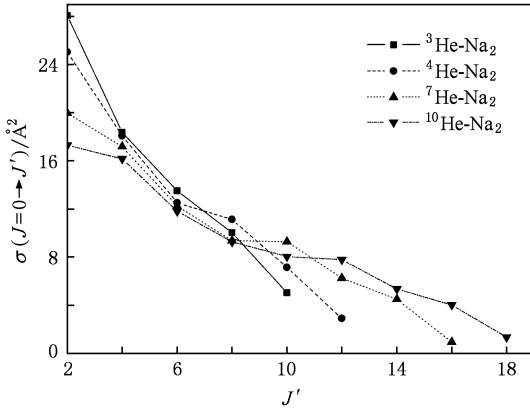


图 2  $E_r = 50 \text{ meV}$ ,  $^3\text{He}$ ,  $^4\text{He}$ ,  $^7\text{He}$ ,  $^{10}\text{He}$ - $\text{Na}_2$  碰撞态转动激发积分散射截面随  $J'$  的变化

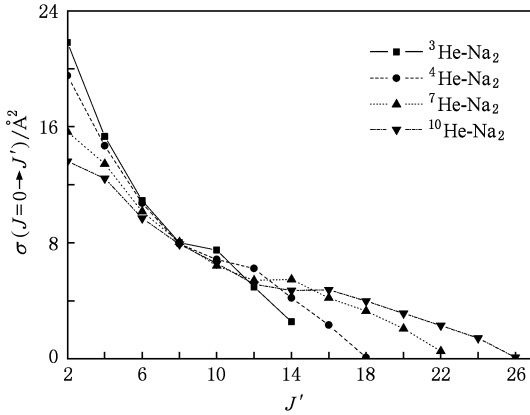


图 3  $E_r = 100 \text{ meV}$ ,  $^3\text{He}$ ,  $^4\text{He}$ ,  $^7\text{He}$ ,  $^{10}\text{He}$ - $\text{Na}_2$  碰撞态转动激发积分散射截面随  $J'$  的变化

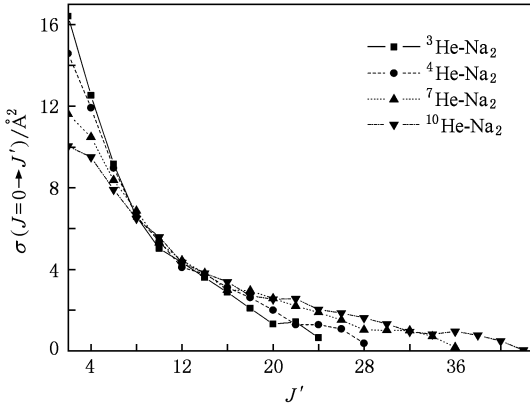


图 4  $E_r = 200 \text{ meV}$ ,  $^3\text{He}$ ,  $^4\text{He}$ ,  $^7\text{He}$ ,  $^{10}\text{He}$ - $\text{Na}_2$  碰撞态转动激发积分散射截面随  $J'$  的变化

于高转动激发态被激发的概率。

对于确定的入射能量,随着体系约化质量的增加,转动激发积分散射截面  $\sigma$  收敛越来越慢,即能够被激发到的最大转动量子态  $J'$  越来越高,如  $E_r =$

200 meV 时,从图 4 中可以看到  $^3\text{He}$ ,  $^4\text{He}$ ,  $^7\text{He}$ ,  $^{10}\text{He}$  与  $\text{Na}_2$  碰撞的转动激发积分散射截面收敛时,  $J'$  分别约为 24, 28, 36, 42; 并且在低激发态,积分散射截面值  $\sigma$  (同一种激发态  $J'$  中) 随体系约化质量的增加逐渐减小, 如  $J' = 4$  时, 从图 4 可以看到  $^3\text{He}$ ,  $^4\text{He}$ ,  $^7\text{He}$ ,  $^{10}\text{He}$  与  $\text{Na}_2$  碰撞的转动激发积分散射截面  $\sigma(J = 0 \rightarrow J' = 4)$  分别为 12.53, 11.92, 10.48, 9.5  $\text{\AA}^2$ , 随着激发态的升高,积分散射截面值  $\sigma$  (同一种激发态  $J'$  中) 随体系约化质量的增加而增加, 如  $J' = 24$  时, 从图 4 可以看到  $^3\text{He}$ ,  $^4\text{He}$ ,  $^7\text{He}$ ,  $^{10}\text{He}$  与  $\text{Na}_2$  碰撞的转动激发积分散射截面  $\sigma(J = 0 \rightarrow J' = 24)$  分别为 0.65, 1.29, 1.89, 2.03  $\text{\AA}^2$ 。

不同能量 He 同位素原子与  $\text{Na}_2$  碰撞的总转动激发积分散射截面  $\sigma_{\text{tot}}$  表示在表 2 中。

表 2 不同能量 He 同位素原子  $^3\text{He}$ ,  $^4\text{He}$ ,  $^7\text{He}$ ,  $^{10}\text{He}$ - $\text{Na}_2$  碰撞总转动激发积分散射截面 (单位:  $\text{\AA}^2$ )

$E_r/\text{meV}$	$^3\text{He-Na}_2$	$^4\text{He-Na}_2$	$^7\text{He-Na}_2$	$^{10}\text{He-Na}_2$
50	75.00	76.83	79.74	81.16
100	71.06	72.60	74.74	75.86
200	66.00	67.06	69.03	70.13

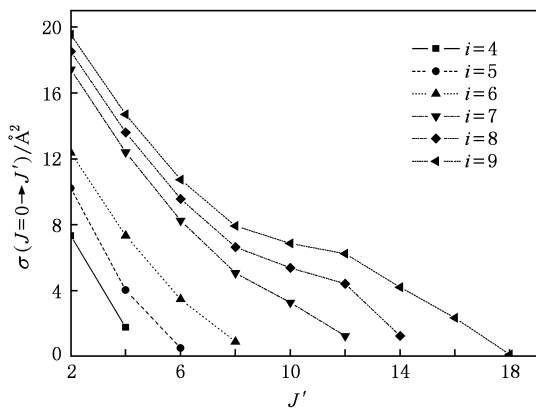
从表 2 中可以看到,对于确定的相对入射能量  $E_r$ ,总转动激发积分散射截面随着体系约化质量的增加依次增加,例如,当  $E_r = 100 \text{ meV}$  时,He 同位素原子  $^3\text{He}$ ,  $^4\text{He}$ ,  $^7\text{He}$ ,  $^{10}\text{He}$  与  $\text{Na}_2$  碰撞的总转动激发积分散射截面  $\sigma_{\text{tot}}$  分别是 71.06, 72.60, 74.74, 75.86  $\text{\AA}^2$ ; 对于相同的体系约化质量,总转动激发积分散射截面随相对入射能量的增加依次减小,例如,当  $E_r = 50, 100, 200 \text{ meV}$  时,  $^4\text{He-Na}_2$  碰撞体系的总转动激发积分散射截面  $\sigma_{\text{tot}}$  依次是 76.83, 72.60, 67.06  $\text{\AA}^2$ 。

我们把上面计算  $^4\text{He}$  原子与  $\text{Na}_2$  碰撞所选用的椭球等势面的相关参数列在表 3 中,利用多体刚性椭球模型计算了相对碰撞能量  $E_r = 100 \text{ meV}$  时,不同椭球等势面对  $^4\text{He-Na}_2$  碰撞体系转动激发积分散射截面的贡献情况,结果如图 5 所示。

图 5 中,曲线  $i = 4, 5, 6, 7, 8, 9$  依次对应表 3 中第 1—4, 1—5, 1—6, 1—7, 1—8, 1—9 个椭球等势面对  $^4\text{He-Na}_2$  碰撞转动激发积分散射截面的贡献情况,即各向异性排斥势的 0—5, 0—9, 0—18, 0—50, 0—70, 0—100 meV 区域对转动激发积分散射截面的影响情况. 从图 5 可以看出,较外层椭球等势面对低转动激发态积分散射截面  $\sigma$  的贡献较大,如第

表3  $E_r = 100$  meV 时,  $^4\text{He-Na}_2$  碰撞所选用的椭球等势面相关参数

$A_i/\text{\AA}$	$B_i/\text{\AA}$	$V/\text{meV}$	$V_i/\text{meV}$	$i$
6.41	5.60	1	2	1
6.11	5.33	2	3	2
5.93	5.15	3	4	3
5.79	5.03	4	5	4
5.51	4.76	7	9	5
5.38	4.64	9	18	6
4.52	3.85	40	50	7
4.27	3.61	60	70	8
4.10	3.44	80	100	9

图5  $^4\text{He-Na}_2$  碰撞体系相互作用势的不同区域对转动激发积分散射截面的影响

1—5 个椭球等势面对  $\sigma(J=0 \rightarrow J'=2)$  的贡献超过了 50%; 内层椭球等势面对高转动激发态积分散射截面  $\sigma$  的影响比外层椭球等势面的影响要大, 如第 1—6 个椭球等势面对  $\sigma(J=0 \rightarrow J'=10)$  的贡献几乎为 0, 而第 1—8 个椭球等势面对其的贡献约为 78.43%, 即较内层的第 7, 8 个椭球等势面对  $\sigma(J=0 \rightarrow J'=10)$  的贡献约为 78.43%; 转动激发态越高, 对其转动激发积分散射截面有影响的椭球等势面

个数越少, 如  $J'=12, 13, 14$  时, 对转动激发积分散射截面  $\sigma(J=0 \rightarrow J'=12)$ ,  $\sigma(J=0 \rightarrow J'=13)$ ,  $\sigma(J=0 \rightarrow J'=14)$  有影响的椭球等势面个数分别为 3, 2, 1 个. 这表明转动激发积分散射截面主要受各向异性排斥势的影响, 外层椭球等势面即长程排斥区对低转动激发积分散射截面影响较大, 高转动激发积分散射截面主要受较内层椭球等势面即短程排斥区的影响.

## 4. 结 论

本文用多体刚性椭球模型计算了相对入射能量  $E_r = 50, 100, 200$  meV 时, He 的同位素原子  $^3\text{He}, ^4\text{He}, ^7\text{He}, ^{10}\text{He}$  与  $\text{Na}_2$  碰撞的状态转动激发积分散射截面和总转动激发积分散射截面, 讨论了同位素替代对转动激发积分散射的影响, 总结出  $^3\text{He}, ^4\text{He}, ^7\text{He}, ^{10}\text{He-Na}_2$  碰撞体系转动激发积分散射截面随相对入射能量和体系约化质量变化的规律, 分析了相互作用势的不同区域对转动激发积分散射截面的影响. 基于以上计算和讨论, 可得到如下结论:

1) 当相对入射能量一定时, 对于相同的体系约化质量, 转动激发积分散射截面值随着激发态  $J'$  的升高逐渐减小, 大体上呈负指数衰减形式; 随着 He 同位素原子  $^3\text{He}, ^4\text{He}, ^7\text{He}, ^{10}\text{He-Na}_2$  碰撞体系约化质量的增加, 转动激发积分散射截面 (同一种激发态  $J'$  中) 在低激发态随体系约化质量的增加而逐渐减小, 在高激发态随体系约化质量的增加而逐渐增加; 总转动激发积分散射截面随体系约化质量的增加依次增加, 随相对碰撞能量的增加依次减小.

2) 转动激发积分散射截面主要受各向异性排斥势的影响, 低转动激发积分散射截面主要受各向异性相互作用势长程排斥区影响, 高转动激发积分散射截面主要受各向异性相互作用势短程排斥区的影响.

[1] Marks A J 1994 *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* **90** 2857  
 [2] Clare S, Marks A J, McCaffery A J 2000 *J. Phys. Chem. A* **104** 7181  
 [3] McCaffery A J 2004 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **6** 1637  
 [4] Osborne M A, McCaffery A J 1994 *J. Chem. Phys.* **101** 5604

[5] Yu C R, Wang R K, Yang X D, Yi X C 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 2906 (in Chinese) [余春日、汪荣凯、杨向东、尹训昌 2008 物理学报 **57** 2906]  
 [6] Wang R K, Yu C R, Shen G X, Gong L X, Yang X D 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 3084 [汪荣凯、余春日、沈光先、龚伦训、杨向

- 东 2009 物理学报 **58** 3084]
- [7] Yu C R, Huang S Z, Shi S H, Cheng X L, Yang X D 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5739 (in Chinese) [余春日、黄时中、史守华、程新路、杨向东 2007 物理学报 **56** 5739]
- [8] Wang R K, Shen G X, Yu C R, Yang X D 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 6932 (in Chinese) [汪荣凯、沈光先、余春日、杨向东 2008 物理学报 **57** 6932]
- [9] Yu C R, Huang S Z, Feng E Y, Wang R K, Cheng X L, Yang X D 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2215 (in Chinese) [余春日、黄时中、凤尔银、汪荣凯、程新路、杨向东 2006 物理学报 **55** 2215]
- [10] Shen G X, Wang R K, Linghu R F, Yang X D 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 155 (in Chinese) [沈光先、汪荣凯、令狐荣锋、杨向东 2008 物理学报 **57** 155]
- [11] Yang C L, Zhu Z H 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 1852 (in Chinese) [杨传路、朱正和 1999 物理学报 **48** 1852]
- [12] Belchior J C, Murrell J N 1994 *J. Chem. Phys.* **101** 2016
- [13] Jone P L, Hefter U, Mattheus A, Witt J, Bergmann K, Miller W, Meyer W, Schinke R 1982 *Phys. Rev. A* **26** 1283
- [14] McCaffery A J, Alwahabi Z T 1991 *Phys. Rev. A* **43** 611
- [15] McCaffery A J, Alwahabi Z T, Osborne M A, Williams C J 1993 *J. Chem. Phys.* **98** 4586
- [16] Agrawal P M, Garg V, Patidar K R 1993 *Chem. Phys. Lett.* **208** 204
- [17] Mu R W, Li Y L, Ji X M, Yin J P 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 6333 (in Chinese) [沐仁旺、李雅丽、纪宪明、印建平 2006 物理学报 **55** 6333]
- [18] Mackie M, Collin A, Javanainen J 2005 *Phys. Rev. A* **71** 017601
- [19] DeMille D 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 067901
- [20] Góral K, Santos L, Lewenstein M 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 170406
- [21] Sun X P, Feng Z F, Li W D, Jia S T 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5727 (in Chinese) [孙晓鹏、冯志芳、李卫东、贾锁堂 2007 物理学报 **56** 5727]
- [22] Zhou S Y, Xu Z, Qu Q Z, Zhou S Y, Liu L, Wang Y Z 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1590 (in Chinese) [周蜀渝、徐震、屈求智、周善钰、刘亮、王育竹 2009 物理学报 **58** 1590]
- [23] Bowman J M 1979 *Chem. Phys. Lett.* **62** 309
- [24] Schepper W, Ross U, Beck D 1979 *Z. Phys. A* **290** 131
- [25] Schinke R, Muller W, Meyer W, McGuire P 1981 *J. Chem. Phys.* **74** 3916
- [26] Jiang G, Xie H P, Tan M L, Zhu Z H 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 665 (in Chinese) [蒋刚、谢洪平、谭明亮、朱正和 2000 物理学报 **49** 665]
- [27] Shen G X, Wang R K, Linghu R F, Yang X D 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 6 (in Chinese) [沈光先、汪荣凯、令狐荣锋、杨向东 2009 物理学报 **58** 6]

# Theoretical calculation of integral cross sections of rotational excitation for collisions in isotopes of He atom with Na<sub>2</sub> molecule \*

Li Wen-Feng<sup>1)</sup> Linghu Rong-Feng<sup>1)2)</sup> Cheng Xin-Lu<sup>1)</sup> Yang Xiang-Dong<sup>1)†</sup>

1) (Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China)

2) (School of Physics and Electronic Science, Guizhou Normal University, Guiyang 550001, China)

(Received 10 July 2009; revised manuscript received 24 August 2009)

## Abstract

Multiple hard-ellipsoid model is a theoretical model which can more accurately describe collisions between He atom and Na<sub>2</sub> molecule. In this paper, we adopted the multiple hard-ellipsoid model to calculate the integral cross sections of rotational excitation for collisions in <sup>3</sup>He, <sup>4</sup>He, <sup>7</sup>He, <sup>10</sup>He-Na<sub>2</sub> systems at different relative incidence energies. This study shows that we can improve the accuracy of the results by increasing the number of equipotential ellipsoid surfaces. Moreover, we find that the integral cross sections of rotational excitation change with the relative incidence energy and reduced mass of the system. Finally, at relative incidence energy of 100 meV, we investigate the influence of different regions of the intermolecular potential on integral cross sections of rotational excitation in <sup>4</sup>He-Na<sub>2</sub> collisions.

**Keywords:** multiple hard-ellipsoid model, He isotopic atoms, integral cross sections, ellipsoid equipotential surface

**PACC:** 3450, 3450E

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10974139, 10964002), the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20050610010), the Key Program of the Natural Science Foundation of the Education Bureau of Guizhou Province, China (Grant No. 2005105), and the Governor's Foundation for Science and Education Elites of Guizhou Province, China (Grant No. 2006(113)), the Science-Technology Foundation of Guizhou Province, China (Grant No. [2009]2066), and the Key Program of the Natural Science Foundation of the Education Commission of Anhui Province, China (Grant No. KJ2010A227).

† Corresponding author. E-mail: xdyang@scu.edu.cn